

A közös pályázatban megfogalmazott kutatási célok eléréséhez szükséges munkát Tennyson professzorral (UCL, London, UK) kettesben sem tudtuk volna elvégezni a kijelölt idő alatt. Így a kutatómunkában magyar, angol és orosz PhD hallgatók és posztdoktorok is részt vettek, nevük a cikkekben megjelenik. Közös kutatási eredményeink egy részének széles körű hasznosulását segítheti elő, hogy mindketten tagjai vagyunk egy IUPAC által finanszírozott kutatási programnak.

A pályázat ideje alatt az OTKA említésével összesen 4 közös, angol nyelvű közlemény jelent meg, a szakma vezető folyóirataiban. A közleményekre már eddig is közel 50 hivatkozás érkezett az ISI szerint (ezek kb. 2/3-a független hivatkozás). Közös eredményeink rövid felsorolása:

(1) Hatékony eljárást és C++ nyelvű számítógépes programot fejlesztettünk ki a kísérletileg mérhető átmenetekből ún. aktív mért rezgési-forgási energiaszinteket előállítására. Az eljárás neve MARVEL: Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels. Az első teszt jellegű alkalmazások elkészültek a víz egyes izotóphelyettesített származékaira (*J. Mol. Spectry.*, 2007).

(2) A MARVEL program segítségével a víz összes szubsztituált származékára meg kívánjuk határozni a MARVEL energiaszinteket. Az így meghatározható energiaszintek és átmenetek reményeink szerint felül fogják írni a most alkalmazott kanonikus adatbázisok (pl. HITRAN) releváns részeit. Az IUPAC TG együttműködés keretében elkészült az első közlemény ezen a területen, mely a *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* folyóiratban van közlés alatt. Minthogy az atomok száma tekintetében a MARVEL eljárás korlátot nem tartalmaz, így várható, hogy azt többatomos molekulák nagyfelbontású szinképeinek értelmezésére a közeljövőben magunk és mások is fel fogják használni.

(3) A pályázat munkatervével teljes összhangban az elmúlt években folytattuk közös vizsgálatainkat a prototipikus háromatomos molekulák, különös tekintettel a H<sub>2</sub>O-ra, mely a legfontosabb üvegház hatású gáz, és a H<sub>3</sub><sup>+</sup>-ra, mely a legfontosabb speciesz az asztrokémiában, potenciális energia hiperfelületeivel (PES), dipólusmomentum felületeivel (DMS), valamint az ezekből variációs alapon (azaz elméletileg végtelenül pontosan) származtatható rezgési-forgási energiaszintekkel és szinképekkel kapcsolatban. Kutatási eredményeinket három közlemény tartalmazza. Hosszabb távon valószínűleg legfontosabb a H<sub>2</sub>O adiabatikus, ún. CVRQD PES-eit részletesen leíró *J. Chem. Phys.* közlemény (2007, a közleményt kiemelésre érdemesnek tartotta a *Virtual Journal of Biological Physics Research*), valamint a víz DMS-ét megadó szintén *J. Chem. Phys.* közlemény (2008). Továbbá minden eddiginél pontosabb empirikus tömegfüggő PES-t állítottunk továbbá elő a H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, H<sub>2</sub><sup>17</sup>O és H<sub>2</sub><sup>18</sup>O izotóphelyettesített származékokra, melyek az összes ismert rezgési-forgási átmenetet legalább 0,05 cm<sup>-1</sup>-es pontossággal adják meg (*J. Mol. Spectry.*, 2006).

Összességében megállapítható, hogy a nagyfelbontású molekulaspektroszkópia területén megvalósult együttműködés sikeres volt mind a magyar, mind az angol csoport számára. A kutatások hozzájárultak nemcsak a magyar elméleti kémiai iskola nemzetközi hírnevének öregbítéséhez, hanem a területet választó és abban remélhetően továbbra is sikeresen tevékenykedő magyar, angol és orosz hallgatók képzéséhez is. A kutatási együttműködés a két csoport között terveink szerint a jövőben is folytatódni fog.